Theoretische Physik 5: Thermodynamik und Statistische Physik

WiSe 2022 / 2023 – Prof. Marc Wagner

Laurin Pannullo: pannullo@itp.uni-frankfurt.de
Marc Winstel: winstel@itp.uni-frankfurt.de

Aufgabenblatt 3

Abgabe am 11.11.2022. Besprechung in den Tutorien vom 14.11. - 18.11.2022

Aufgabe 1 [*D-dimensionale Kugel*] (4 Pkt.)

In der Berechnung der mikrokanonischen Zustandssumme des idealen Gases wird auf das Volumenintegral über eine $3N$-dimensionale Kugel zurückgegriffen. Leite die in Gl. (27) verwendete Formel für ein D-dimensionales Kugelvolumen mit Radius R durch Integration über das Volumenelement in sphärischen Koordinaten her. Berechne zudem die Oberfläche derselben Kugel, indem du das Volumenintegral entsprechend modifizierst. Betrache nun exemplarisch das Volumenverhältnis von einer Kugelschale, deren Dicke $0,1\%$ des Außenradius R beträgt, zu der Vollkugel mit Radius R für $D = 3, 100, 10000$.

Aufgabe 2 [*Mikrokanonische Zustandssumme des klassischen idealen Gases*] (1+1+1+1+1=5 Pkt.)

In der Vorlesung (Kapitel 1.7) wurde die Zustandssumme des idealen Gases über die quantenmechanische Betrachtung von N freien, ununterscheidbaren Teilchen in einer 3-dimensionalen Box behandelt. Wir werden im Folgenden das Resultat (Gl. (33) im Skript) in der klassischen Betrachtung reproduzieren. Dazu betrachten wir eine 3-dimensionale kubische Box mit Volumen V, in der sich ein aus N monoatomaren, ununterscheidbaren Gasteilchen (als freie Massenpunkte approximiert) bestehendes ideales Gas befindet. Energie- oder Teilchenaustausch mit der Umgebung ist ausgeschlossen.

Zunächst werden wir jedoch die mikrokanonische Zustandssumme für klassische Berechnungen im Allgemeinen betrachten. Die mikrokanonische Zustandssumme $\Omega(E, V, N)$ wird im Skript durch die Anzahl von Mikrozuständen mit Energien $E_r \in [E - \delta E, E]$ definiert, also

$$\Omega(E, V, N) = \Phi(E, V, N) - \Phi(E - \delta E, V, N), \tag{1}$$

wobei $\Phi(E, V, N)$ die Anzahl von Mikrozuständen mit Energie $\leq E$ ist. Klassisch wird die Anzahl von Zuständen definiert als das Phasenraumvolumen im $(\vec{q_1}, \vec{p_1}, \ldots, \vec{q_N}, \vec{p_N}))$-Raum dividiert durch $(2\pi\hbar)^{3N}$, wobei $(\vec{q_i}, \vec{p_i})$ die generalisierten Koordinaten und Impulse des i-ten Gasteilchens bezeichnen. Da wir ununterscheidbare Gasteilchen beachten, fügt man auch hier zusätzlich den Faktor $1/N!$ hinzu (siehe auch die Diskussion zu Gl. (25) und (26) im Skript, der Faktor wird auch Gibbs-Faktor genannt).

(i) Zeige, dass sich die mikrokanonische Zustandssumme in der klassischen Betrachtungsweise für $\delta E/E \ll 1$ berechnen lässt durch

$$\Omega(E, V, N) \approx \frac{\partial \Phi(E, V, N)}{\partial E} \delta E. \tag{2}$$

Hierzu definiert man die $3N-1$-dimensionalen Zustandsdichte $\Gamma(E,V,N) = \frac{\partial\Phi(E,V,N)}{\partial E}$. Zeige, dass

$$\Gamma(E,V,N) = \frac{1}{\Gamma_0}\int \mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3p_1\ldots\mathrm{d}^3q_N\mathrm{d}^3p_N\delta(E-H(\vec{q_1},\vec{p_1},\ldots,\vec{q_N},\vec{p_N})), \tag{3}$$

wobei $\Gamma_0 = N!(2\pi\hbar)^{3N}$. $H(\vec{q_1},\vec{p_1},\ldots,\vec{q_N},\vec{p_N})$ ist die Hamilton-Funktion des Systems.

(ii) Berechne zunächst $\Phi(E,V,N)$ für das klassische, ideale Gas und zeige, dass dein Resultat äquivalent zu Gl. (30) im Skript ist.

(iii) Berechne nun $\Omega(E,V,N)$, indem du $\Gamma(E,V,N)$ über Gl. (3) ausrechnest.

(iv) Aufgrund von Gl. (2) würde man naiv erwartet, dass $\Omega(E,V,N)$ von δE abhängt. Betrachte den Logarithmus von Gl. (2) und argumentiere, dass dieser Ausdruck für $N \gg 1$ im Wesentlichen unabhängig von δE ist. Argumentiere, dass sich dein Ergebnis für $\ln\Omega(E,V,N)$ nur unwesentlich von Gl. (34) im Skript unterscheidet.
Hinweis: Überlege dir das typische Skalierungsverhalten von $\ln\Gamma$ *als Funktion von* N*. Du kannst dabei deine Erfahrung aus dem Beispiel des idealen Gases verwenden.*

(v) $\Phi(E,V,N)$ ist als das Volumen einer $3N$-dimensionalen Hypersphäre berechnet worden. Überlege dir allgemein, warum $\Omega(E,V,N)$ oft auch durch $\Phi(E,V,N)$ approximiert werden kann. Betrachte zudem die Approximation von $\ln\Omega(E,V,N)$ durch $\ln\Phi(E,V,N)$.

Aufgabe 3 [*Mikrokanonische Zustandssumme des Ising-Modells*] (2+5+2+2=11 Pkt.)

In dieser Aufgabe untersuchen wir die mikrokanonische Zustandssumme des eindimensionalen Ising-Modells, welches ein sehr simples Modell für Ferromagneten ist. In diesem Modell werden N Spins σ_i auf einem eindimensionalen Gitter angeordnet. Die räumliche Fixierung auf dem Gitter macht die Spins unterscheidbar. Die Spins interagieren mit ihren nähsten Nachbarn mit der Kopplung J und mit einem externen Magnetfeld h. Dabei können die Spins die Werte $\sigma_i = \pm 1$ annehmen. Die Hamiltonfunktion des Systems für eine gegebene Konfiguration an Spins $r = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N)$ ist

$$H = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i, \tag{4}$$

wobei wir periodische Randbedingungen annehmen, d.h., $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

(i) Drücke die Hamiltonfunktion durch die Anzahl der positiven Spins N_+, die Anzahl der negativen Spins N_- und die Anzahl der zusammenhängenden Domains von gleichen Spins D aus.
Hinweis: Zum Beispiel wäre für eine Spinkonfiguration $r = (+1,-1,-1,+1,-1,+1,+1)$ *die Anzahl der Domains* $D = 4$ *(durch die periodischen Randbedingungen gehören der erste und der letzte Spin zur gleichen Domain).*

(ii) Wir betrachten nun den Spezialfall $J = 0$, d.h., die Spins interagieren nicht miteinander, sondern nur mit dem äußeren Magnetfeld.

(a) Argumentiere, dass in diesem Spezialfall nur die Anzahl der negativen Spins N_- relevant ist. Berechne die Anzahl der möglichen Konfigurationen für ein festes N_- und zeige, dass diese Konfigurationen die Energie

$$E_{N_-} = h\,[2N_- - N] \tag{5}$$

besitzen.

(b) Gl. (5) zeigt, dass die realisierbaren Energien diskret und äquidistant verteilt sind. In solch einem Fall ist die Berechnung der mikrokanonischen Zustandssumme nach Gl. (19) im Skript für $N \gg 1$ unzweckmäßig. Stattdessen berechnet man die Anzahl der Zustände für jede der möglichen diskreten Energien E_{N_-} und interpretiert dann E_{N_-} als kontinuierliche Variable. Berechne Ω auf diese Weise unter den Annahmen, dass $N_- \gg 1$, $N \gg 1$, $(N - N_-) \gg 1$.

(c) Wir nehmen nun an, dass die Zustandssumme nach Gl. (19) im Skript berechnet wird. Was muss für negative Energien $E < 0$ gelten damit die so erhaltene Zustandssumme unter der Vorrauseztung $N \gg 1$ im Wesentlichen unabhängig von δE ist? Wie müsste die Definition von Ω angepasst werden, dass Ω im Wesentlichen unabhängig von δE für $E \gg 0$ ist? Welche Probleme ergeben sich für $E \approx 0$?

(iii) Wir betrachten nun den Spezialfall $h = 0$, d.h., es liegt kein äußeres Magnetfeld an und die Spins interagieren nur miteinander. Argumentiere, dass in diesem Spezialfall nur die Anzahl der Domains D relevant ist. Berechne die Anzahl der möglichen Konfigurationen für die möglichen Werte von D und zeige, dass diese Konfigurationen die Energie

$$E_D = J\,[2D - N]$$

besitzen.

(iv) Offensichtlich scheint eine Äquivalenz der beiden Spezialfälle für $D \to N_-$ und $J \to h$ vorzuliegen. Argumentiere qualitativ warum dem so ist und gib eine explizite Transformation für die Spins σ_i an um die Hamiltonfunktion (4) für $h = 0$ in den Spezialfall für $J = 0$ zu überführen.